

描述离散系统动力学演变的 Monte Carlo 方法分析

赵海波 郑楚光

(华中科技大学煤燃烧国家重点实验室, 湖北 武汉 430074)

摘要 通用动力学方程通过描述离散系统中颗粒尺度分布的演变过程来量化颗粒动力学演变过程, 而 Monte Carlo(MC)算法是求解通用动力学方程的重要方法。目前几种主流的 MC 算法为 Liffman 的直接模拟 Monte Carlo 算法 (DSMC)、阶梯式常体积法、常数目法和多重 Monte Carlo(MMC) 算法。利用这些 MC 算法描述理想的纯凝并工况和纯破碎工况, 发现: 由于避免了多个动力学事件之间的解耦过程, 基于事件驱动的 MC 算法比基于时间驱动的 MC 算法具有更高的计算精度和更低的计算代价; 由于尽量减少对整体系统的扰动, 阶梯式恢复模拟颗粒数目的 MC 算法比连续式恢复模拟颗粒数目的 MC 算法具有更高的精度; 由于始终保持计算区域体积, 多重 Monte Carlo 算法具有更友好的扩展性。

关键词 颗粒群平衡模拟; 颗粒尺度分布; 数值算法; 计算精度; 计算代价

中图分类号: TK222 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-231X(2006)Suppl.1-0213-04

ANALYSIS OF FOUR MONTE CARLO METHODS FOR THE DYNAMIC EVOLUTION IN DISPERSED SYSTEMS

ZHAO Hai-Bo ZHENG Chu-Guang

(State Key Laboratory of Coal Combustion, Huazhong Univ. of Sci. & Tech., Wuhan 430074, China)

Abstract General Dynamic Equation (GDE) describes quantitatively the dynamic process in dispersed systems by means of the time evolution of particle size distribution (PSD). Monte Carlo method is one of the important approaches to take account of GDE. Four commonly used MC methods include Liffman's direct simulation Monte Carlo (DSMC), stepwise constant volume method, constant number method, and multi-Monte Carlo (MMC) method. These MCs are realized numerically to simulate pure coagulation and pure breakage cases. The following conclusions are made: event-driven MC methods, which avoid the uncoupling process of dynamic events, have higher precision and higher efficiency than time-driven MC methods; those stepwise constant number MCs, which avoid the disturbance on the whole system as possible, show better performances than those constant number MCs; multi-Monte Carlo method, which maintains the computational domain, exhibits friendlier expansibility than other MCs.

Key words population balance modelings; particle size distribution; numerical methods; computation precision; computation cost

1 前言

离散系统的动力学演变过程在气溶胶、可吸入颗粒物等等领域受到广泛关注。这些系统中可能有颗粒的产生(如破碎、成核等)或消亡(如凝并、沉积等), 可能有颗粒的长大(如冷凝、凝并等)或缩小(如蒸发、破碎等), 此时颗粒尺度分布 (Particle Size

Distribution, PSD) 往往随时间和空间而变化。颗粒尺度分布的演变过程可量化离散系统的动力学演变过程, 并且数学上可由通用动力学方程 (General Dynamic Equation, GDE) 或称为粒数衡算方程 (Population Balance Equation, PBE) 所描述。GDE 由于其部分积分微分特性而难以数值求解^[1], Monte

收稿日期: 2006-01-23; 修订日期: 2006-06-07

基金项目: 国家重点基础研究专项经费 (No.2002CB211602); 国家自然科学基金重点项目 (No.90410017)

作者简介: 赵海波 (1977-), 男, 湖南宁乡人, 讲师, 博士生, 研究方向为多相流数值模拟等。

Carlo(MC)方法^[2~6]是一种重要算法。从时间尺度的设定方面看, MC方法可分为两大类,一类是时间驱动(time-driven)的MC算法^[2,6],它在离散的时间窗口内考虑所有模拟颗粒可能发生的任何动力学事件;另外一类是事件驱动(event-driven)的MC算法^[3~5],它依据已知的事件概率来随机选定可能发生的事件类型和计算事件间的时间间隔。如果依据颗粒演变过程模拟颗粒数目和计算区域体积是否发生变化而划分, MC方法也可分为常体积(constant volume)法^[2~4,6]和常数目(constant number)法^[5~6]。

目前几种主流的MC方法为: Matsoukas等^[5]发展的常数目法,属于事件驱动的MC法; Maisels等^[4]发展的阶梯式常体积法,属于事件驱动的MC法和阶梯式常数目法; Liffman^[2]所发展的直接模拟Monte Carlo算法,属于时间驱动的MC方法、阶梯式常体积法和阶梯式常数目法,下文称之为Liffman DSMC算法;作者^[6]发展的多重Monte Carlo(MMC)算法,同时属于常数目法、常体积法和基于时间驱动的MC方法。以上几种算法都经过了较为全面的验证,且均具有较高的计算精度。但是目前尚无几种算法之间的横向比较,各种算法之间的计算精度和计算代价也无法进行统一的分析和评价。本文选择纯凝并(颗粒数目减少而颗粒总质量不变)、纯破碎(颗粒数目增加而颗粒总质量不变)等理想工况,来详细比较和分析以上4种MC方法的计算精度和计算代价,并讨论其各自的优缺点和适用范围。

2 四种MC方法的比较和分析

颗粒总数目浓度 N (尺度分布的零阶矩)和颗粒质量浓度 V (尺度分布的一阶矩)是离散系统尺度分布演变的两个最重要的参数,本文选择它们作为评判参数。在本文的数值模拟中,初始颗粒尺度分布均满足单分散性分布,且初始颗粒尺度 $v_0=1$ (无量纲)。

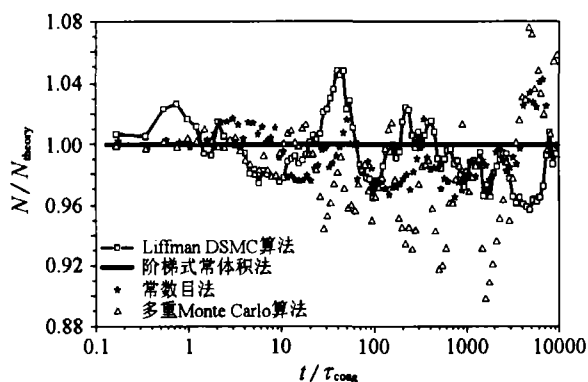
2.1 纯凝并工况

由于篇幅限制,本文仅选取理想的常凝并核工况来检验4种MC方法的计算代价和计算精度,此时尺度为 u 和 v 的两颗粒的凝并核 $\beta(u, v) = 10^{-10} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$,初始颗粒数目浓度为 $N_0 = 10^{10} \text{ m}^{-3}$,颗粒特征凝并时间尺度定义为 $\tau_{\text{coa}} = 1/(N_0 A)$ 。理论分析解参照文献[2]。初始时刻模拟颗粒初始数目 N_i 均为1000, Liffman DSMC算法和MMC算法中乘积常数 α 设置为0.01;单次MC循环的结果如图1, Liffman DSMC算法、阶梯式常体积法、常数目

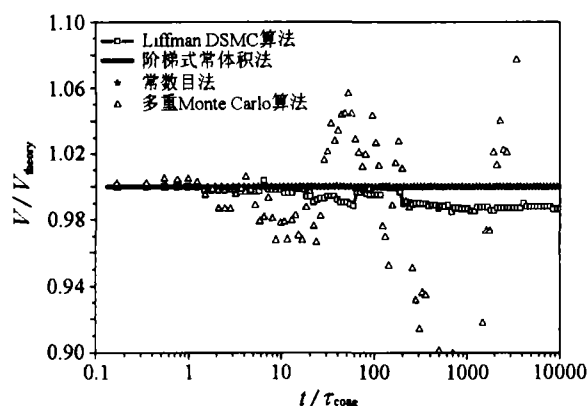
法(采用质量法实现)和多重Monte Carlo算法的初始模拟颗粒数目均为1000,而计算代价分别为7.45 s、33.80 s、55.34 s和23.03 s(计算环境为Athlon Xp2500+, 512M)。

综合起来,对凝并事件的描述,事件驱动的MC方法(阶梯式常体积法和常数目法)要比时间驱动的MC方法(Liffman DSMC算法和MMC算法)在计算精度方面要更好一些。时间驱动MC的主要误差来源于解耦过程:在一个 Δt 内,可能同时发生若干个凝并事件。这些事件并不完全相互独立而不能互相解耦,同一颗颗粒可能参与了多次凝并事件,同时扮演了跟踪颗粒和凝并伙伴的角色。此种误差可称之为“解耦误差”。而事件驱动MC对凝并事件的处理是一个事件接着一个事件发生,不可能存在一颗模拟颗粒在一个时间步长内参与多次凝并事件和扮演多重身份的问题。对于Liffman DSMC算法而言,另外一个误差源是:当需要倍增子系统时,模拟颗粒数目并不一定恰恰是初始模拟颗粒数目的一半,此时需要在复制现有模拟颗粒之后随机添加或抛弃一定数目的模拟颗粒,使得新的子系统内模拟颗粒数目等于初始值,这个过程所导致的误差可称为“阶梯式常体积误差”。而阶梯式常体积法由于基于事件驱动,考虑二元凝并事件时并不存在“阶梯式常体积误差”。对于MMC算法而言,当演变时间较长时,误差越来越大,这主要是由于虚拟颗粒数目权值之间的差距越来越大。严格来说,MMC算法对凝并事件进行处理时,只有当虚拟颗粒 i 的数目权值 kwt_i 等于其凝并伙伴 j 的数目权值 kwt_j 时,或者两颗粒尺度相等时,才能严格地保持颗粒数目浓度和质量浓度符合实际过程^[7]。如果 kwt_i 与 kwt_j 的差距较小时,通过MC循环基本可以减小误差的繁衍和传递,但是如果演变时间较长时,虚拟颗粒的尺度差异越来越大,虚拟颗粒的数目权值越来越大,将扩大和传递这种误差。此种误差是MMC算法强制保持常体积和常数目所必须付出的代价,可称之为“常体积和常数目误差”。对于常数目法而言,由于每次凝并事件发生之后都需要添加一颗随机的现有模拟颗粒的复制体而恢复模拟颗粒总数目,这个过程将对系统产生一定程度的扰动,这种误差可称之为“常数目误差”。由于常数目法对系统的扰动频率高于阶梯式常体积法,可以推断“常数目误差”比“阶梯式常体积误差”对计算精度的影响更大一些。另外,常数目法采用接受-拒绝法(acceptance-rejection method)^[3]来数值实现,而文献[3]证明接受-拒绝法只能近似描述颗粒动力学演变过程,所带来的误差可称之为“接受-拒绝误差”,而阶梯式

常体积法所采用的倒数法 (inverse method)^[3] 则能精确描述颗粒动力学事件。最后, 以上四种 MC 均存在 MC 方法所固有的统计误差, 它与模拟颗粒数目的平方根成反比, 在模拟颗粒数目达到 $O(10^3)$ 量级之后, 这个误差对结果的影响并不明显。



(a) 颗粒数目浓度



(b) 颗粒质量浓度

图 1 Case1, 常凝并核工况

四种 MC 算法之间计算代价的差异由于以下几种原因引起。

(1) 时间驱动 MC 的低效率。通常来说, 由于时间驱动 MC 需要明确的时间窗口离散而比事件驱动 MC 低效。一方面, 在一个时间步长内可能没有任何动力学事件发生; 另外一方面, 时间驱动 MC 为了尽量避免“解耦误差”而引入乘积常数 α 来增加 MC 循环的次数, 这将增大时间驱动 MC 的计算代价。但是常凝并核工况是一个例外, 这是因为此时每颗颗粒具有相同的凝并概率, 故在一个时间步长内平均发生的凝并事件数目为模拟颗粒数目和乘积常数的乘积, 这里 $N_0 \times \alpha = 10$, 此时比事件驱动 MC 效率更高一些。

(2) 模拟颗粒数目的差异。Liffman DSMC 算法和阶梯式常体积法中模拟颗粒数目在 $N_0/2 \sim N_0$ 之

间, 而常数目法和 MMC 算法中始终保持在 N_0 , 由于 4 种 MC 处理凝并事件时均需要对所有颗粒进行二重循环, 故模拟颗粒数目减少将大大减少计算代价。

(3) 倒数法和接受 - 拒绝法的计算效率的差异。倒数法精确描述了颗粒动力学事件, 但需要在每次事件之后通过二重循环来计算总凝并概率, 故模拟颗粒数目较多时计算代价较大。而接受 - 拒绝法的计算代价通常较小一些, 但是如果颗粒尺度分布范围较宽, 导致随机产生的颗粒的凝并核与最大凝并核的比值很小, 因此大量拒绝动作的产生将极大地降低接受 - 拒绝法的计算效率。

(4) 数目恢复过程所消耗的计算代价的差异。常数目法需要比阶梯式常体积法更多的随机过程来恢复模拟颗粒总数目, 故消耗的计算代价也更大一些。

(5) MMC 算法中强制保持常体积和常数目的计算代价。MMC 算法的时间步长不仅与颗粒凝并核有关而且与颗粒的数目权值有关, 某些工况下时间步长很小, 降低了 MMC 算法的计算效率, 这是 MMC 算法强制保持常体积和常数目所必须付出的代价, 可以把 MMC 算法看作是一种“时间换空间”的算法。

总的说来, 对于凝并的描述, 事件驱动 MC 要比时间驱动 MC 更精确和更经济, 而其中又以阶梯式 MC 更为合适。MMC 算法只适合于描述较短演变时间内的凝并过程。

2.2 纯破碎工况

为了检验 MC 算法对于复杂破碎问题的描述, 本文选择指数阶破碎速率、多元破碎工况, 其中体积为 v 的颗粒的破碎速率 $S(v) = v^{1.8}$, 尺度为 u 的子颗粒的产生概率 $\gamma(u, v) = \delta(u, u/12)$, 产生的子颗粒数目 $b(u) = 12$, 子颗粒等尺度分布, $N_0 = 3000 \text{ m}^{-3}$, 颗粒特征破碎时间尺度定义为 $\tau_{brk} = 1/S(v_0) = 1/(v_0^{1.8})$ 。理论分析解参照文献 [8]。单次 MC 循环的结果如图 2, 时间驱动 MC 中 α 均设置为 0.0002, Liffman DSMC 算法、阶梯式常体积法、常数目法和多重 Monte Carlo 算法的初始模拟颗粒数目均为 3000, 而计算代价分别为 45.28 s、8.19 s、0.8 s 和 185.69 s。

显然, 时间驱动 MC 的模拟结果整体上要好于事件驱动 MC, 但计算代价要稍微高一些。常数目法精确描述了颗粒质量浓度, 对数目浓度的误差在 4% 之内; 阶梯式常体积法的误差控制在 2% 之内, 该误差是“阶梯式常体积误差”, 参见图 2(b) 中颗粒质量浓度的曲线; Liffman DSMC 算法的误差包括“阶梯式常体积误差”和“解耦误差”, 其计算代价高于阶

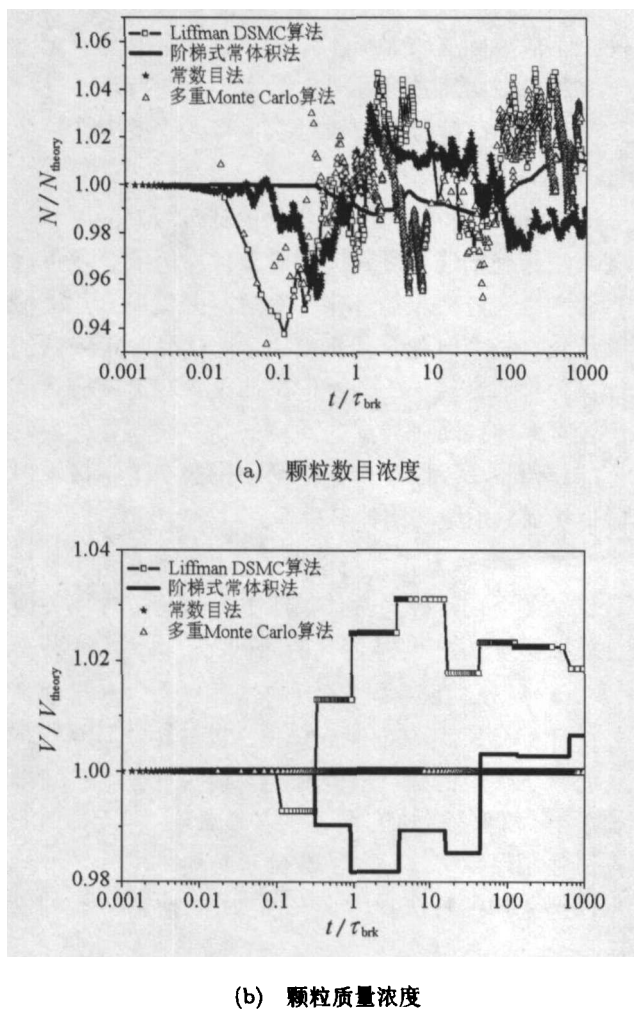


图2 指数阶破碎速率和多元破碎

梯式常体积法的原因是时间驱动 MC 的低效率。MMC 算法对于颗粒数目浓度的误差控制在 4% 之内, 基本与 Liffman DSMC 算法的计算精度一致, 但是 MMC 算法能够精确描述颗粒质量浓度, 这是因为 MMC 严格保持常体积的缘故。MMC 算法的计算代价最高, 一方面是由于时间驱动 MC 的低效率, 一方面是由于在合并子颗粒的过程中所耗费的 CPU 时间, 即强制保持常体积和常数目所必须付出的计算代价。总体而言, 对于破碎工况的描述以 MMC 算法和常数目法更为合适。

3 结论

本文数值实现了 Liffman DSMC 算法、梯式常体积法、常数目法和 MMC 算法对凝并和破碎的描述, 详细比较了 MC 的计算精度和计算代价。发现阶

梯式常体积法能够精确描述纯凝并过程, 对于多元破碎过程具有较高的计算精度, 而常数目法对于凝并过程的计算精度均低于梯式常体积法, 但是在可以接受的范围之内, 且整体而言更适合描述多元破碎过程。而时间驱动 MC, 无论是 Liffman DSMC 还是 MMC 算法, 均无法精确描述纯凝并、纯破碎过程, 且计算效率也通常低于事件驱动 MC。MMC 算法能够较好地描述多元破碎过程, 但是对于其他工况, 由于时间驱动 MC 本身的低效率和低精度, 以及空间换时间所付出的计算精度和计算效率, 只有离散系统演变时间较短时才基本满意。另外, 由于 MMC 算法能够同时保持常数目和常体积法, 可以完全抛弃其他三种 MC 所必须依赖的子系统概念, 所以具有考虑颗粒尺度分布空间扩散的扩展性。

总之, 对于颗粒尺度分布的时间演变过程的描述, 如果能够认为空间各向同性而允许引入子系统概念时, 我们建议采用梯式常体积法或常数目法描述凝并和破碎。如果描述颗粒尺度分布的空间演变过程, 如果演变时间较短, 可以发展 MMC 算法来达到目的。

参 考 文 献

- [1] 赵海波, 郑楚光. 求解通用动力学方程的算法的研究进展. 力学进展, 2006, 32(1): 129-145
- [2] K Liffman. A Direct Simulation Monte-Carlo Method for Cluster Coagulation. J. Comp. Phys., 1992, 100(1): 116-127
- [3] A L Garcia, C van den Broek, M Aertsens, et al. A Monte Carlo Simulation of Coagulation. Physica, 1987, 143A: 535-546
- [4] A Maisels, F E Kruis, H Fissan. Direct Simulation Monte Carlo for Simultaneous Nucleation, Coagulation, and Surface Growth in Dispersed Systems. Chem. Eng. Sci., 2004, 59(11): 2231-2239
- [5] Y Lin, K Lee, T Matsoukas. Solution of the Population Balance Equation Using Constant-Number Monte Carlo. Chem. Eng. Sci., 2002, 57(12): 2241-2252
- [6] H Zhao, C Zheng, M Xu. Multi-Monte Carlo Method for Coagulation and Condensation/Evaporation in Dispersed Systems. J. Colloid Interface Sci., 2005, 286(1): 195-208
- [7] H Zhao, C Zheng. Monte Carlo Simulation for Simultaneous Particle Coagulation and Deposition. Sci. China Ser. E-Eng. Mater. Sci., 2006, 49(2):222-237
- [8] M Kostoglou, A J Karabelas. An Assessment of Low-Order Methods for Solving the Breakage Equation. Powder Technology, 2002, 127(2): 116-127